

Structure électronique des molécules : ↗

L'hybridation des orbitales atomiques

I – Le modèle des orbitales atomiques hybrides

Définition d'un OA hybride

L'hybridation sp

L'hybridation sp^2

L'hybridation sp^3

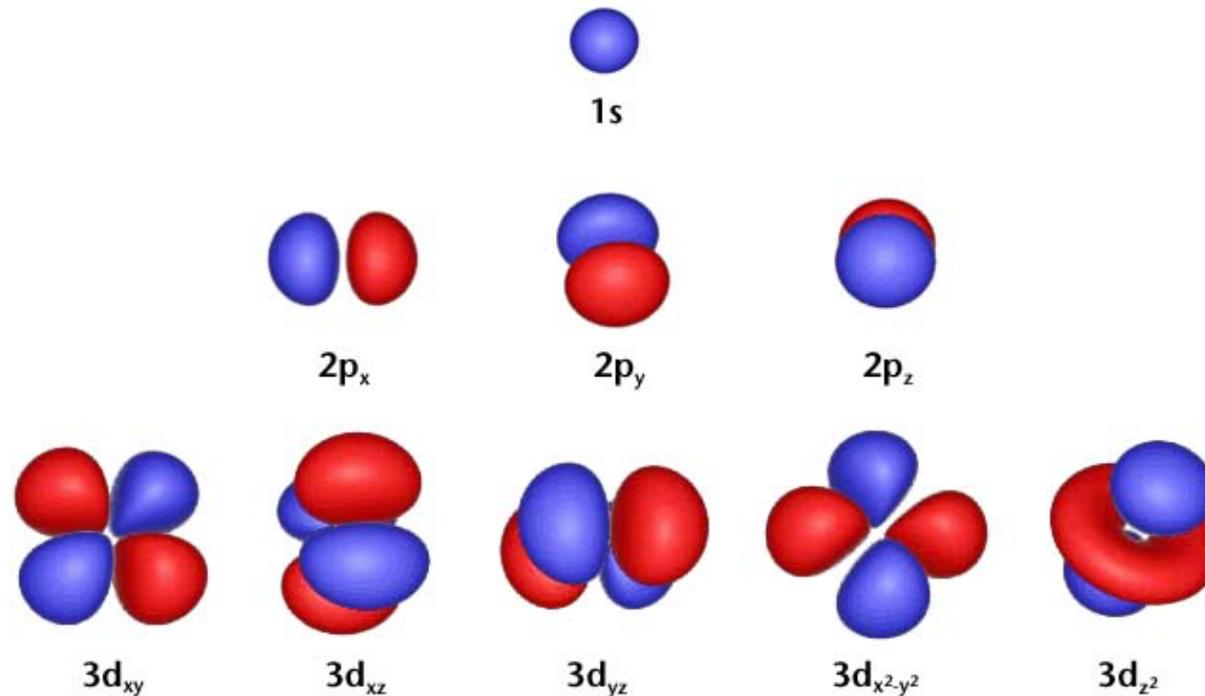
L'hybridation sp^3d

L'hybridation sp^3d^2

II – Doubles et triples liaisons

Orbitales atomiques

Dans un atome isolé, les orbitales atomiques utilisées pour décrire les états électroniques possèdent des symétries particulières (s, p, d, f). *Ces symétries reflètent la symétrie sphérique de l'atome.*



Orbitales atomiques hybrides

Dans une molécule, le nuage électronique autour de l'atome s'adapte à son environnement et diffère de celui de l'atome isolé. ***Les orbitales atomiques se déforment.***

Le modèle des orbitales hybrides (ou ***modèle des liaisons de valence***), permet de décrire les liaisons covalentes et les paires libres d'une molécule à l'aide d'orbitales atomiques "déformées" : ***les orbitales atomiques hybrides.***

Les orbitales atomiques hybrides sont construites à partir du mélange des orbitales atomiques de l'atome isolé.

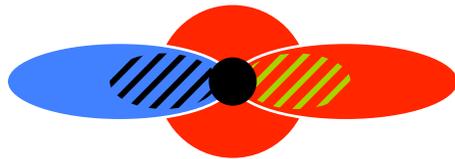
Mathématiquement, le mélange de 2 OA s'écrit comme une combinaison linéaire :

$$\text{hybride} = C_1 \cdot \text{OA}_1 + C_2 \cdot \text{OA}_2$$

L'hybridation sp

L'hybridation sp met en jeu le mélange d'une OA s et d'une OA p. La combinaison de ces deux OA donne lieu à deux hybrides sp orientés à 180° l'une de l'autre :

$$sp = c_1 \times s + c_2 \times p$$



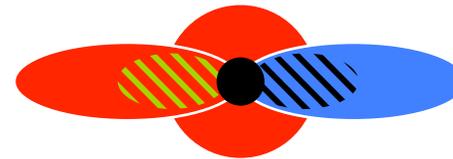
interférences destructives *interférences constructives*

Schéma de l'hybride sp :



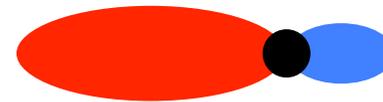
Zone de faible densité électronique *Zone de forte densité électronique*

$$sp = c_2 \times s - c_1 \times p$$



interférences constructives *interférences destructives*

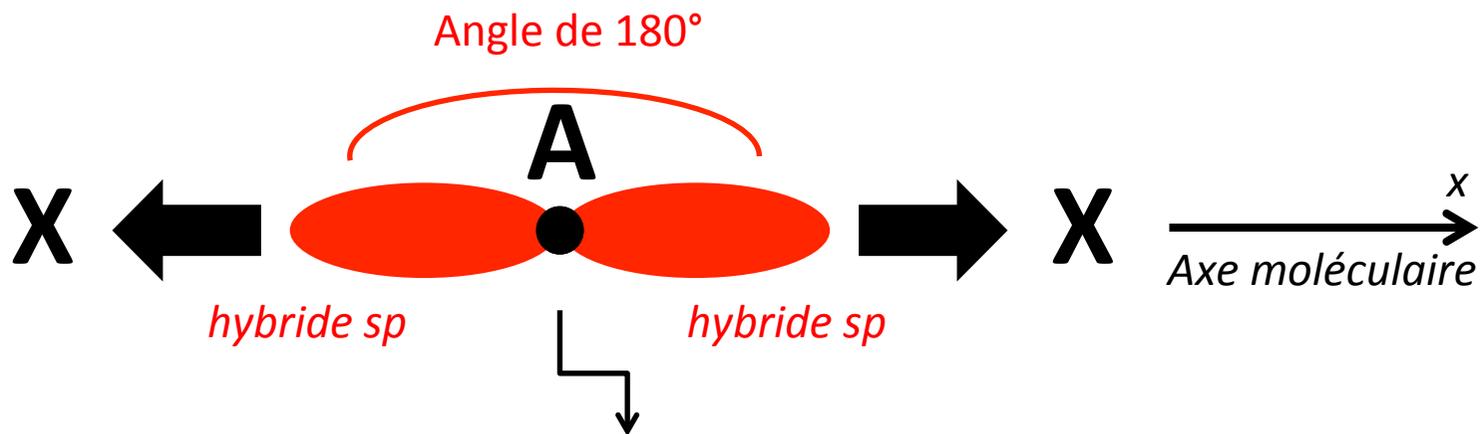
Schéma de l'hybride sp :



Zone de forte densité électronique *Zone de faible densité électronique*

L'hybridation sp

L'hybridation sp intervient dans les molécules de type AX_2 (ou AXE), dont la figure de répulsion est linéaire.

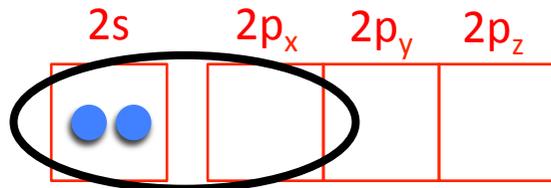


L'état d'hybridation de l'atome A est de type sp

L'hybridation sp

Exemple : la molécule BeH_2

Be [isolé] : $2s^2$



mélange s + p
→ 2 hybrides sp

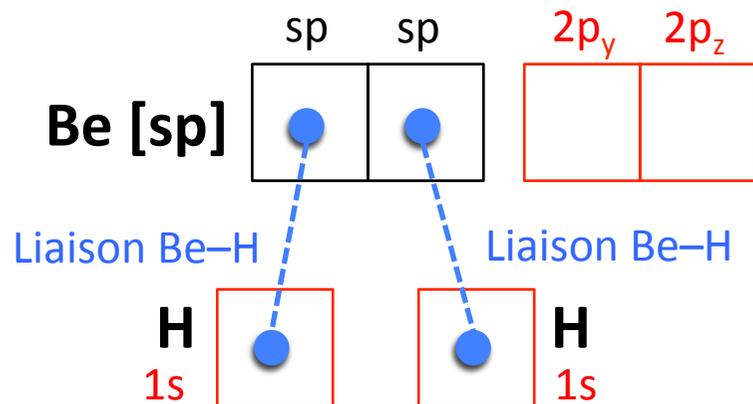
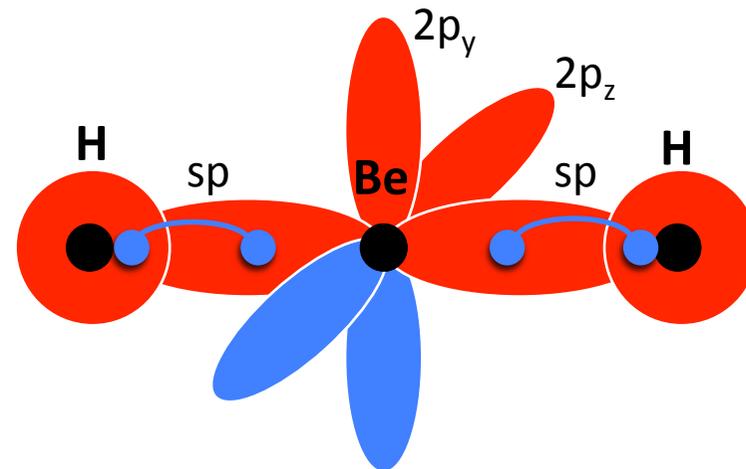


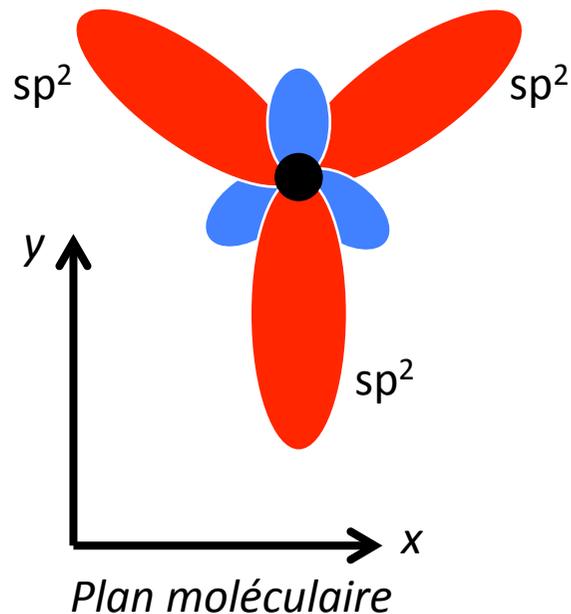
Schéma orbitalaire



Les OA $2p_y$ et $2p_z$ ne s'hybrident pas.
Elles gardent la même forme que dans
l'atome isolé.

L'hybridation sp^2

L'hybridation sp^2 met en jeu le mélange d'une OA s et de deux OA p . La combinaison de ces trois OA donne lieu à trois hybrides sp^2 orientés à 120° l'une de l'autre :

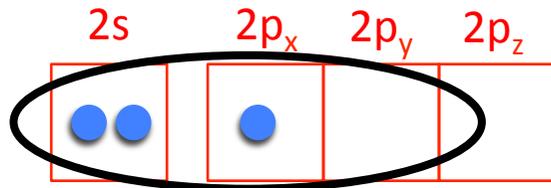


L'hybridation sp^2 intervient dans les molécules de type AX_3 (ou AX_2E ou AXE_2), dont la figure de répulsion est triangulaire.

L'hybridation sp^2

Exemple : la molécule BH_3

B [isolé] : $2s^2 2p^1$



mélange $s + p + p$
 \rightarrow 3 hybrides sp^2

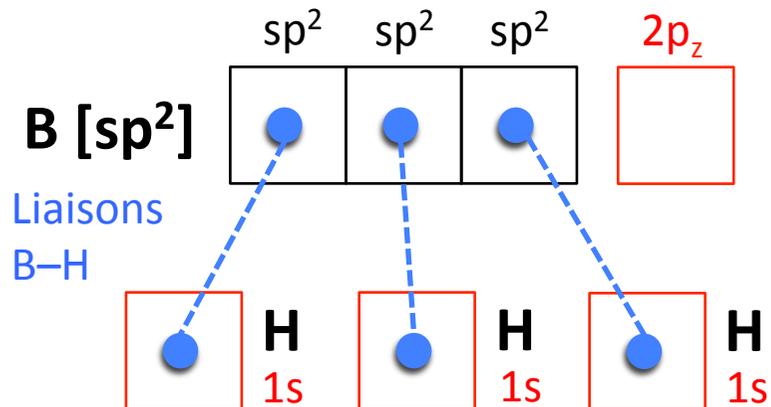
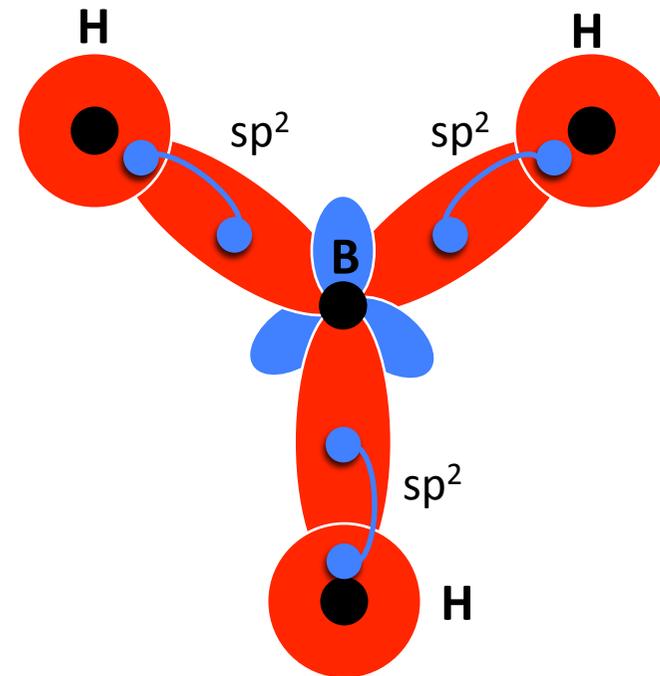


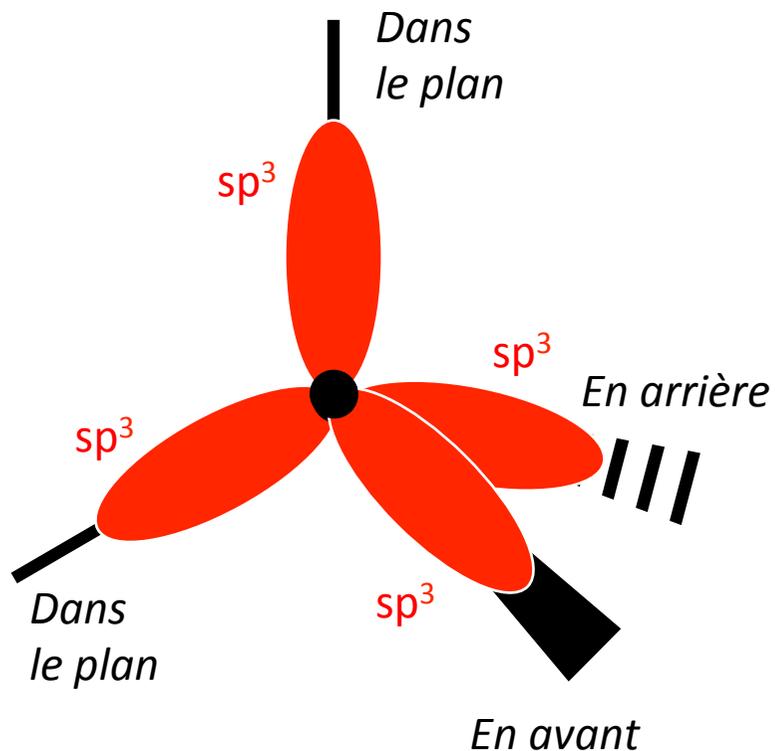
Schéma orbitalaire



L'OA $2p_z$ (perpendiculaire au plan moléculaire) ne s'hybride pas. Elle garde la même forme que dans l'atome isolé.

L'hybridation sp^3

L'hybridation sp^3 met en jeu le mélange d'une OA s et de trois OA p . La combinaison de ces quatre OA donne lieu à quatre hybrides sp^3 orientés à $109,5^\circ$ l'une de l'autre :



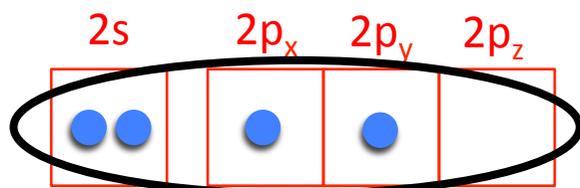
L'hybridation sp^3 intervient dans les molécules de type AX_4 (ou AX_3E , AX_2E_2 , etc.), dont la figure de répulsion est tétraédrique.

L'hybridation sp^3

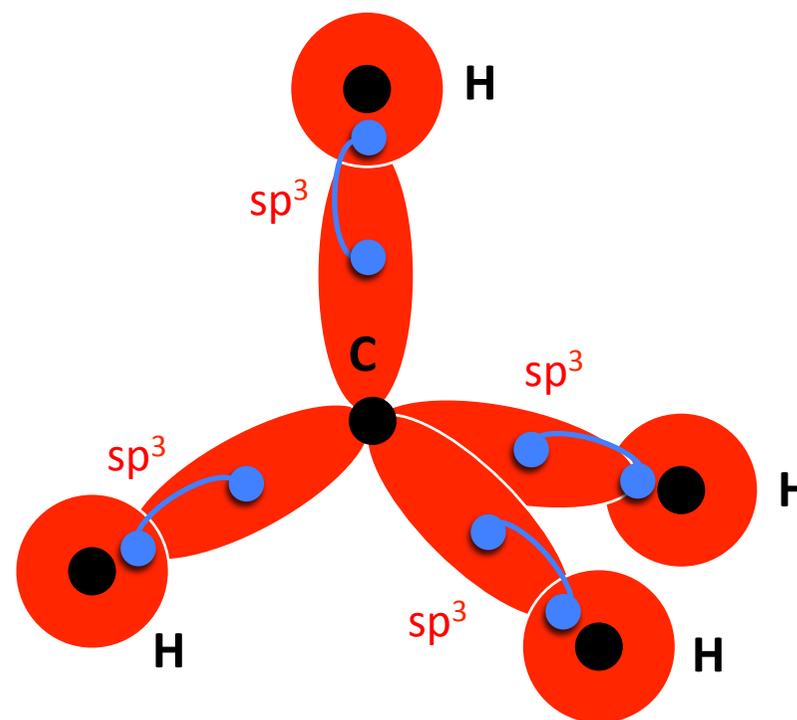
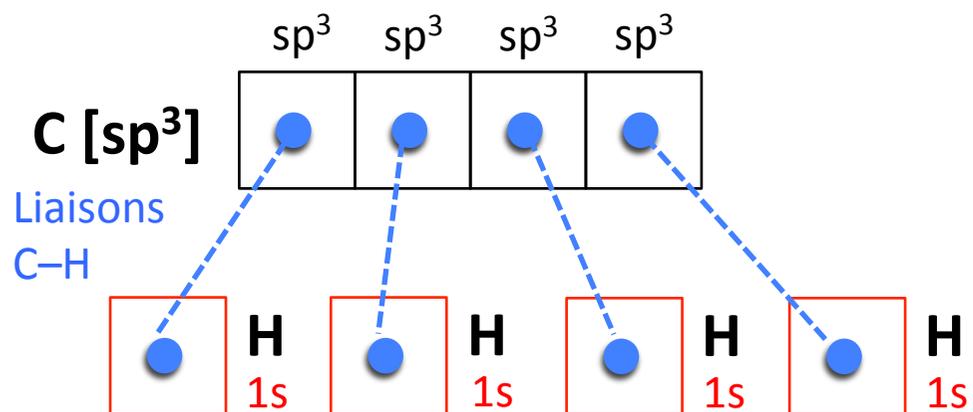
Exemple : la molécule CH_4

Schéma orbitalaire

C [isolé] : $2s^2 2p^2$



mélange $s + p + p + p$
 \rightarrow 4 hybrides sp^3

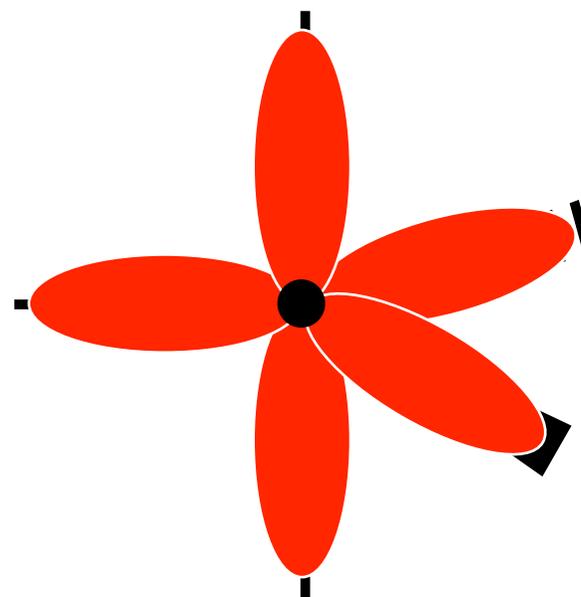


L'hybridation sp^3d

A partir de la couche M, les OA de type d peuvent participer à l'établissement des liaisons covalentes (hypervalence).

L'hybridation sp^3d met en jeu le mélange d'une OA s, de trois OA p et d'une OA d. La combinaison de ces cinq OA donne lieu à cinq hybrides sp^3d .

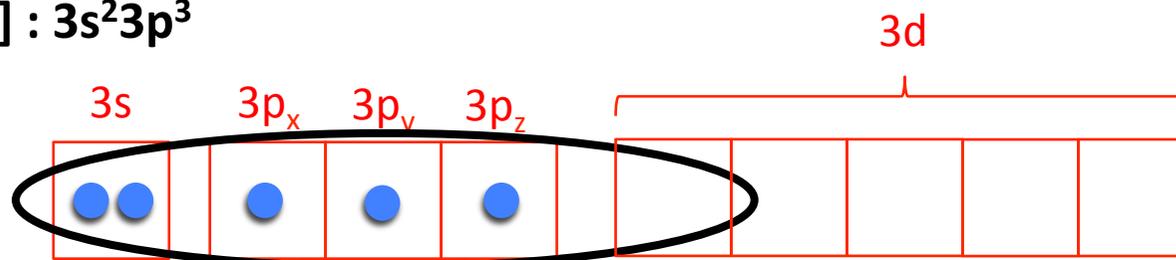
Ce type d'hybridation intervient dans les molécules de type AX_5 (ou AX_4E , AX_3E_2 , etc.), dont la figure de répulsion est une bipyramide trigonale.



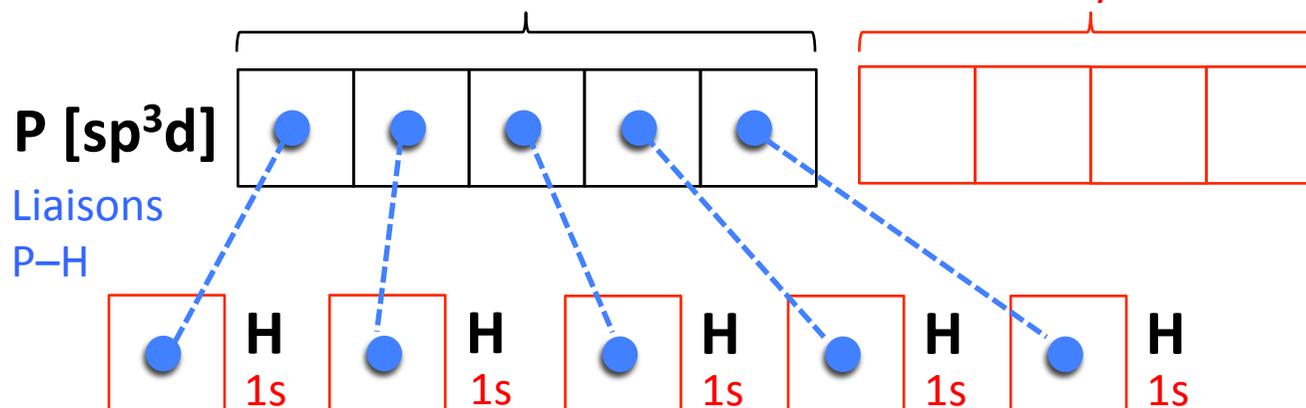
L'hybridation sp^3d

Exemple : la molécule PH_5

P [isolé] : $3s^23p^3$



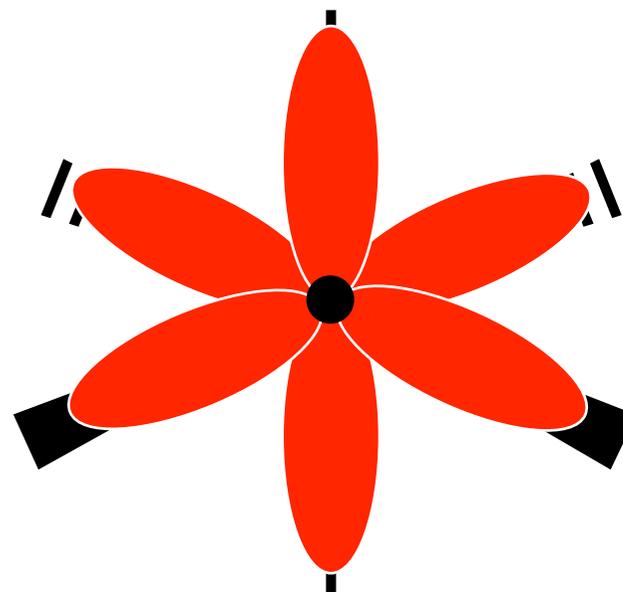
mélange $s + p + p + p + d$
 \rightarrow 5 hybrides sp^3d



L'hybridation sp^3d^2

L'hybridation sp^3d^2 met en jeu le mélange d'une OA s, de trois OA p et de deux OA d. La combinaison de ces six OA donne lieu à six hybrides sp^3d^2 .

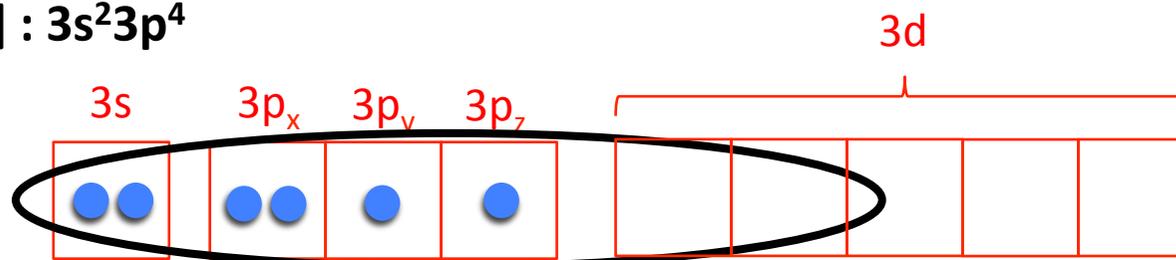
Ce type d'hybridation intervient dans les molécules de type AX_6 (ou AX_5E , AX_4E_2 , etc.), dont la figure de répulsion est une bipyramide à base carrée.



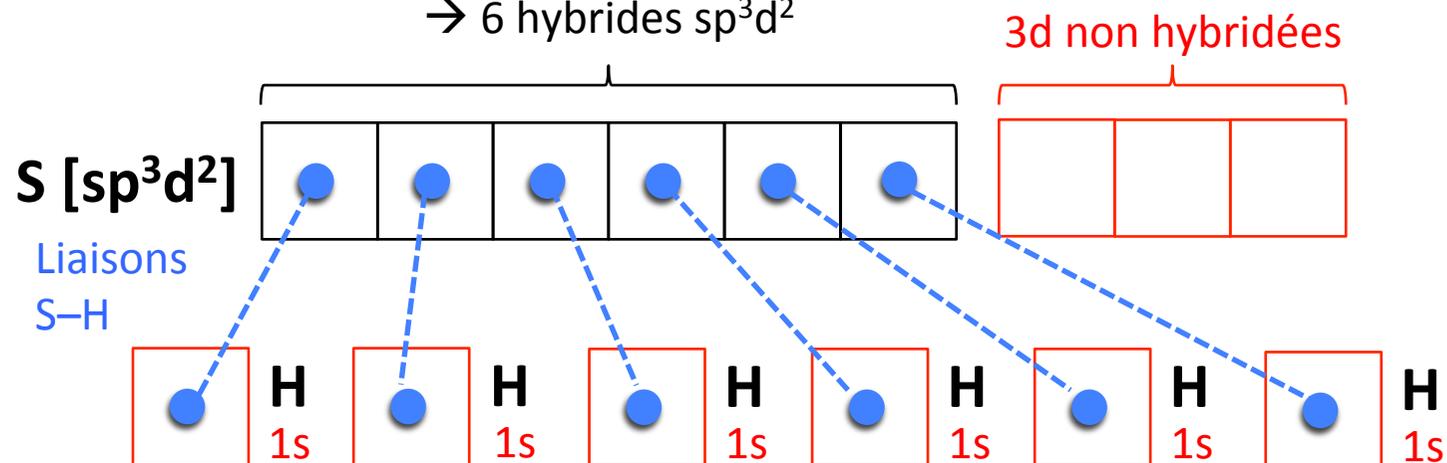
L'hybridation sp^3d^2

Exemple : la molécule SH_6

S [isolé] : $3s^23p^4$

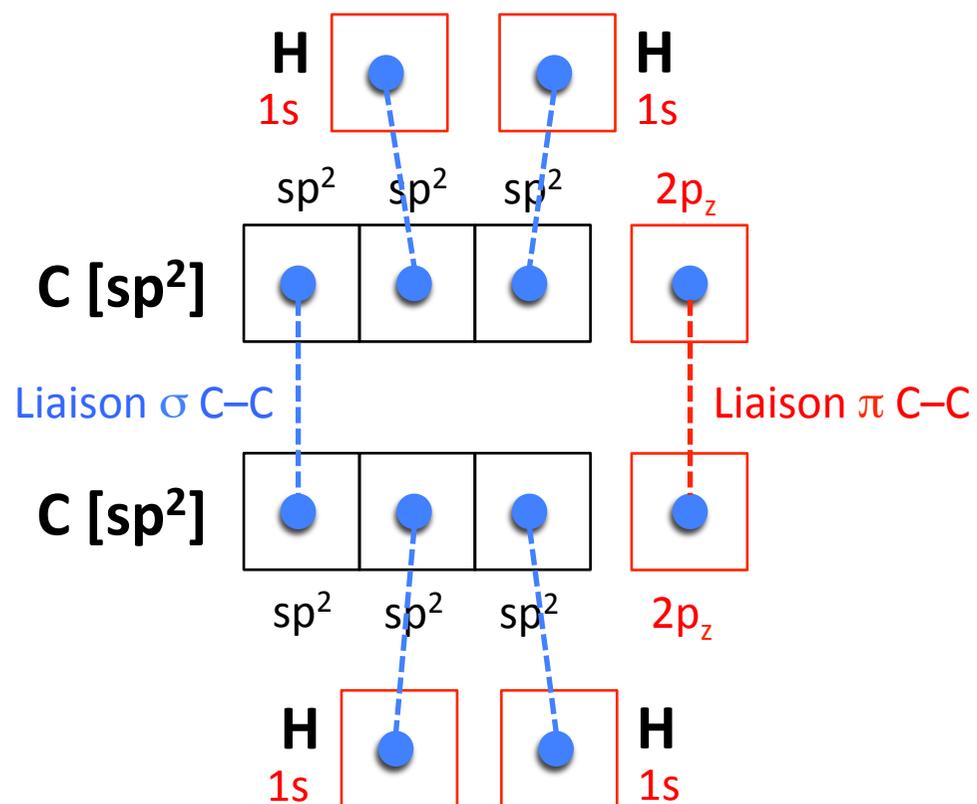
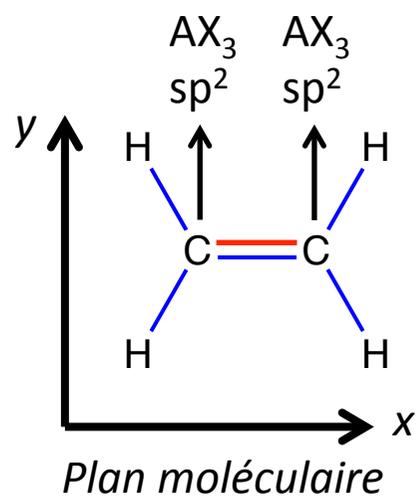


mélange $s + p + p + p + d + d$
 \rightarrow 6 hybrides sp^3d^2



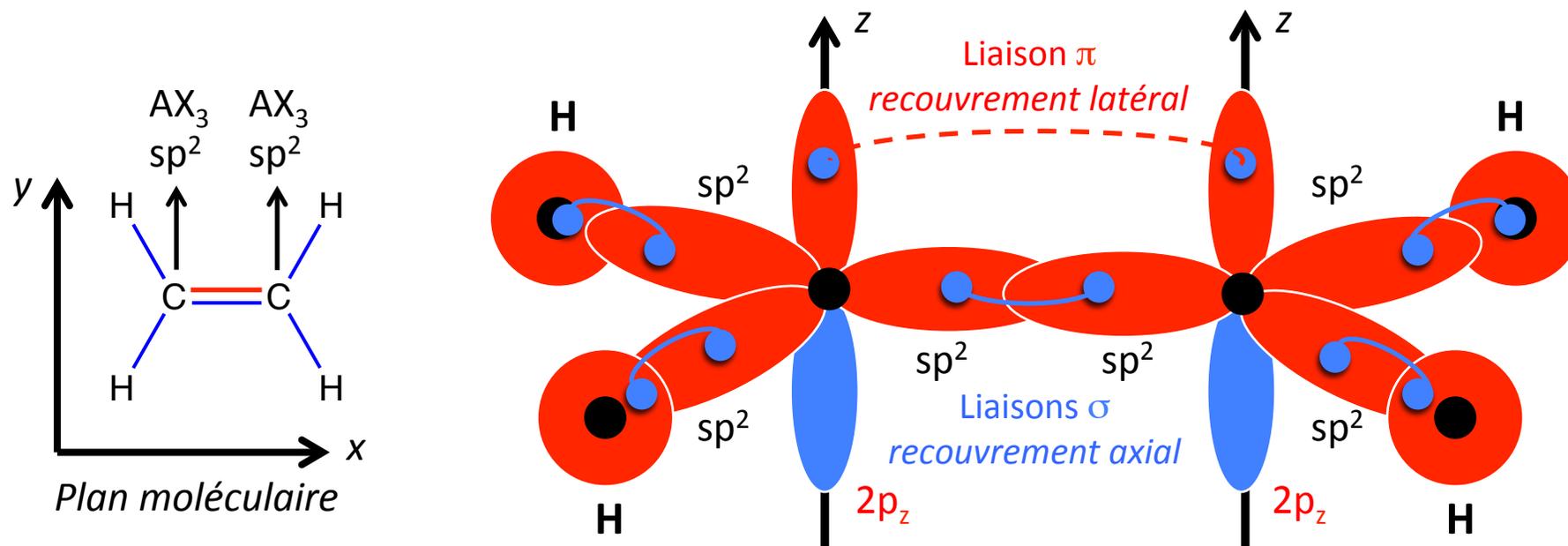
Liaisons multiples

Exemple : la molécule d'éthylène C_2H_4



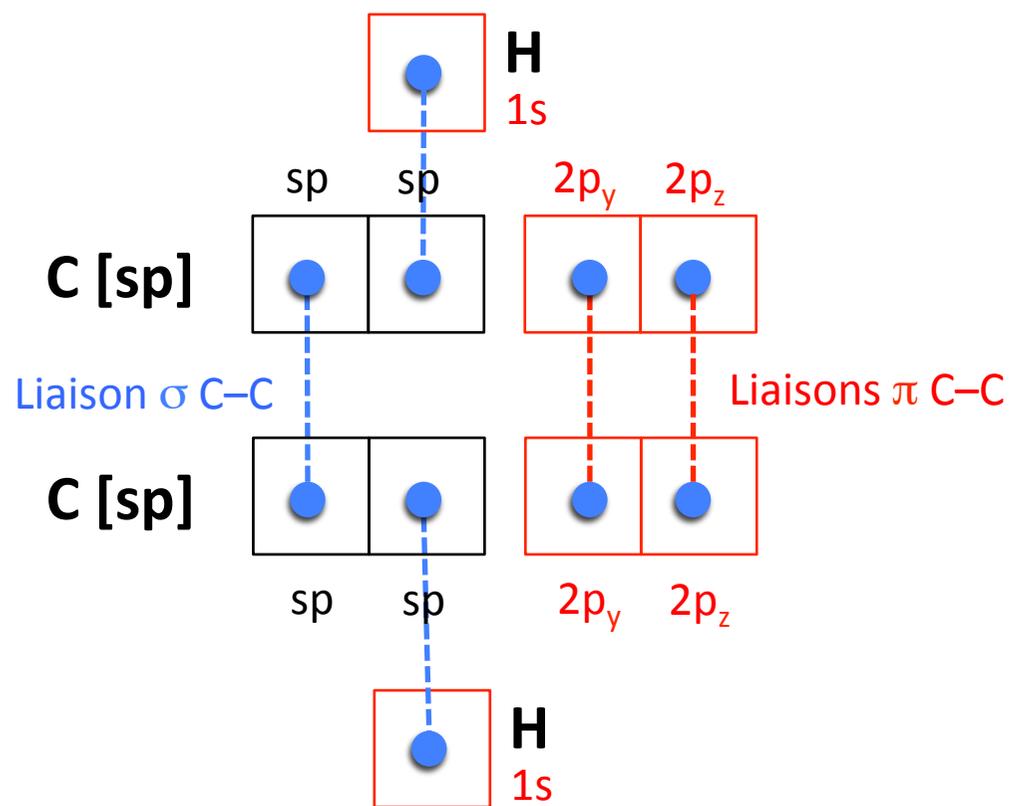
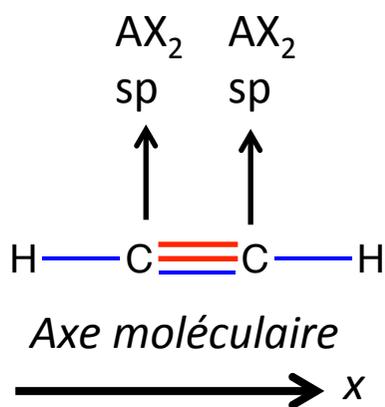
Liaisons multiples

Exemple : la molécule d'éthylène C_2H_4



Liaisons multiples

Exemple : la molécule d'acétylène C_2H_2



Liaisons multiples

Exemple : la molécule d'acétylène C_2H_2

